

**ПРОНИЦАЕМОСТЬ УПОРЯДОЧЕННОЙ СТРУКТУРЫ
СОСТАВЛЕННОЙ ИЗ СФЕРИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ**

А.А. Шерстобитов

Научный руководитель: профессор, д.ф.-м.н. А.М. Бубенчиков

Национальный исследовательский Томский государственный университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 36, 634050

E-mail: sherstobitovalexandr@gmail.com**PERMEABILITY ORDERED STRUCTURE COMPOSED OF SPHERICAL NANOPARTICLES**

A.A. Sherstobitov

Scientific Supervisor: Prof., Dr. A.M. Bubenchikov

Tomsk State University, Russia, Tomsk, Lenin str., 36, 634050

E-mail: sherstobitovalexandr@gmail.com

Abstract. *In the present study, we performed theoretical studies on permeability of a ordered structure composed of twenty spherical nanoparticles of the same size. The numerical solution is constructed using turn-based schemes of higher-order accuracy. The interaction between structure elements and moving molecules is determined by the V.Y. Rudyak and S.L. Krasnolutsky potential. It was found, that the tested model structure has four times greater permeability to helium in comparison with the case of the penetration through it of methane.*

Введение. Компактированные материалы уже нашли применение для таких задач, как разделение газов и очистка воды, а также они используются в качестве катализаторов в химических процессах и имеют большие перспективы использования в современных высокотехнологических процессах. Многообразие форм частиц и способов их соединения делают задачу исследования проницаемости таких материалов чрезвычайно сложной. Многие аспекты работы мембран из компактированных наночастиц схожи с работой биологических мембран [1]. В отличие от работ по физике поверхностных явлений [2-4], где результат получается методом аналогии с уже изученными явлениями, развитие мембранных технологий требует систематических расчетов.

В настоящей работе теоретическими методами изучается способность прохождения молекул через регулярную структуру из идеальных сферических наночастиц. Целью исследования является изучение дифференциальной проницаемости слоя сферических наночастиц в отношении атомов гелия и молекул метана.

Математическая модель. Рассматриваемая структура состоит из сферических наночастиц одинакового размера, центры которых лежат в одной плоскости. Для используемых частиц существует потенциал взаимодействия между наночастицей и молекулой:

$${}^3_9U(\rho_j) = {}_9U(\rho_j) - {}_3U(\rho_j), \quad (1)$$

здесь ρ_j – расстояние от центра j -ой частицы пористой структуры до пробной молекулы или атома.

$${}_9U(\rho) = C_9 \left\{ \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^9} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^9} \right] + \frac{9}{8\rho} \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^8} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^8} \right] \right\}; \quad (2)$$

$${}_3U(\rho) = C_3 \left\{ \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^3} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^3} \right] - \frac{3}{2\rho} \left[\frac{1}{(\rho - \rho_p)^2} - \frac{1}{(\rho + \rho_p)^2} \right] \right\}, \quad (3)$$

где ρ_p – радиус наночастицы, $C_3 = \frac{2\pi\epsilon_{12}\sigma_{12}^6}{3V}$, $C_9 = \frac{4\pi\epsilon_{12}\sigma_{12}^{12}}{45V}$, V – объем, приходящийся на один атом углерода в алмазной структуре.

В качестве пористого элемента рассмотрим систему из 20 алмазных наночастиц радиуса $r = 4$ нм, в каждой из которых находится $6.4 \cdot 10^4$ атомов углерода, образующих 4 туннеля для двигающейся частицы. Частицы принимаются стационарными, а перемещающаяся молекула (атом) двигаются в совокупном вандерваальсовском поле двадцати наночастиц, следуя основному уравнению динамики Ньютона. Силовое воздействие от каждой наночастицы определяется градиентом потенциала (1) – (3). Уравнение динамики перемещающейся частицы интегрируется с применением технологии Рунге-Кутты.

Результаты расчетов. При конструировании слоя мы использовали туннельную укладку частиц, при которой перемещающиеся молекулы не могут преодолевать барьер в зазорах в каждом из столбцов наночастиц.

Характер расположения частиц в слое показан на рис. 1.

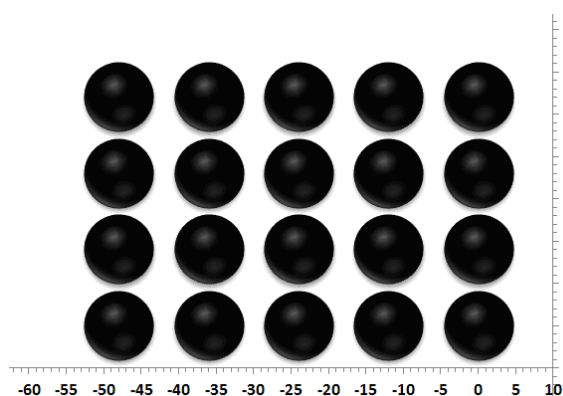


Рис. 1. Структура пористого элемента

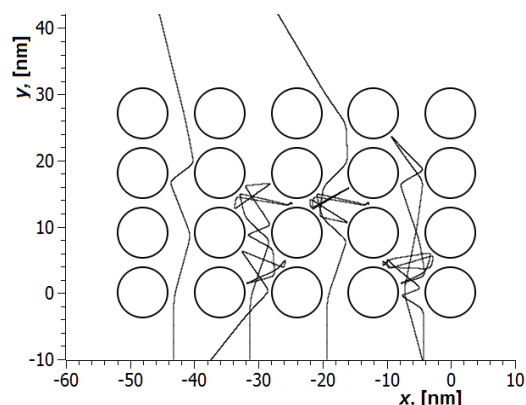


Рис. 2. Траектории атомов гелия

Начало координат помещаем в центре нижней частицы правого столбца. Пробные молекулы будут двигаться со скоростью 1300 м/с в положительном направлении оси OY с расстояния 10 нм и будут иметь начальные координаты по оси OX соответственно: -4.2; -19.3; -31.3; -43.2 нм. Получившиеся траектории движения атомов гелия показаны на рис. 2.

На рис. 3. приведены скорости движения атомов гелия, пущенных с позиций -4.2 и -19.3 нм по оси OX и с той же позиции по оси OY. Как видно, из представленных ниже рисунков, гелий активно использует пористое пространство, подходя достаточно близко к поверхности наночастиц. Прежде всего это обусловлено относительно более низкой энергией взаимодействия в системе: гелий-наночастица в сравнении со случаем метан-наночастица. Расчеты показали, что проницаемость рассматриваемого фильтрующего элемента по гелию составляет порядка 68%.

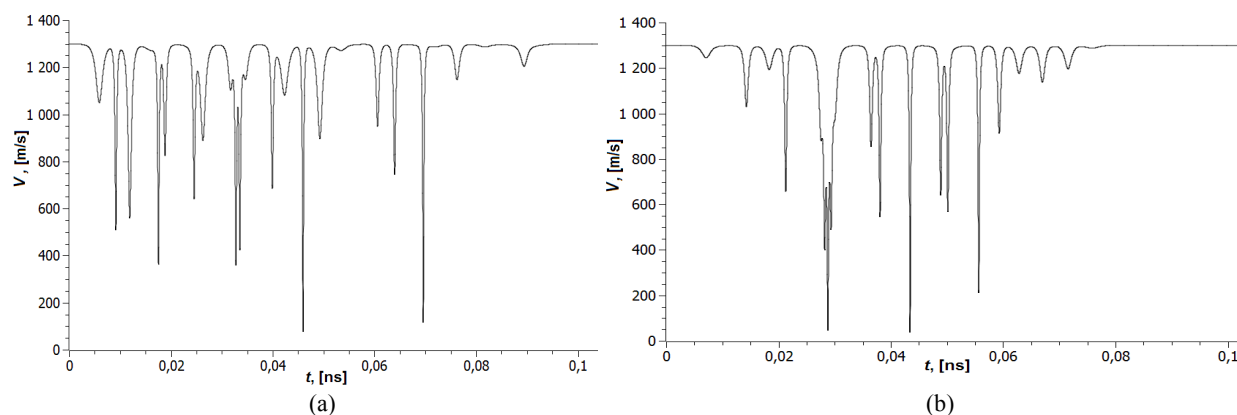


Рис. 3. (a) – график скорости He $x_0 = -4.2$ нм; (b) – график скорости He $x_0 = -19.3$ нм

Пробные молекулы метана, были пущены с позиций: -4.9; -17.8; -30.8; -41.8 нм оси OX со скоростью 650 м/с (средняя тепловая скорость движения молекул метана при нормальных условиях). Более высокая энергия взаимодействия молекулы метана с наночастицей, реализующаяся в виде сил отталкивания, позволяет ей перемещаться лишь в приосевой зоне туннеля, составленного сферическими наночастицами. Выполненные расчеты показали, что проницаемость рассматриваемого фрагмента слоя по метану составляет величину порядка 16%.

Заключение. Использование идеальных сферических частиц в качестве элементов компактирования слоя, а также применение идеального способа укладки этих элементов позволяет построить строгую математическую модель процесса проникновения молекул через слой нанопористой структуры. Взаимодействие наночастиц с молекулярными компонентами газового окружения – есть результат воздействия каждого атома структурного элемента с перемещающейся молекулой, поэтому это взаимодействие имеет ван-дер-ваальсову природу. В отличие от гравитационных взаимодействий, где сила имеет определенное направление, силы Ван-дер-Ваальса являются и притягивающими, и отталкивающими. Обычно силы притяжения являются дальнодействующими, а силы отталкивания имеют большую величину и проявляются на коротких расстояниях. Как показали проведенные вычисления, силы отталкивания в случае движения молекул метана являются более мощными в сравнении со случаем движения гелия. Поэтому, более подвижные атомы гелия ближе подходят к частицам алмазной структуры. При этом они имеют большую скорость движения и лучше проникают через компактированный слой наночастиц. В результате чего мы имеем коэффициент проницаемости по гелию - 68% против 16% по метану.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Panin, V. E., Egorushkin, V. E., & Panin, L. E. (2010). The physical mesomechanics of mass transfer in biological membranes and nanostructural materials. *International Journal of Terraspace Science and Engineering*, 3(1), 39-61.
2. G.E. Remnev, V.V. Uglov, V.I. Shymanski, S.K. Pavlov, A.K. Kuleshov (2014). Formation of nanoscale carbon structures in the surface layer of metals under the impact of high intensity ion beam. *Applied Surface Science*, vol. 310, pp. 204-209.
3. V.Ya. Rudyak, S.L. Krasnolutskii and D.A. Ivanov (2012) The Interaction Potential of Nanoparticles. *Doklady Physics*, 2012, 57(1), 33-35.